学校编码：10384　　　　分类号 ______ 密级 ______
学号：20051301609　　　　UDC ____________________

厦门大学

硕 士 学 位 论 文

迭代反位移变换的 Arnoldi 算法的一种变形

A variant of the iterated shift-and-invert Arnoldi method for quadratic eigenvalue problems

唐 予 婷

指导教师姓名： 卢 琳 璋 教授
专 业 名 称： 计 算 数 学

论文提交日期： 2008 年 5 月
论文答辩日期： 2008 年 月
学位授予日期： 2008 年 月

答辩委员会主席：______________
评 阅 人：______________

2008 年 5 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其它个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文而产生的权利和责任。

责任人（签名）：

年 月 日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1、保密（　），在　　　年解密后适用本授权书。

2、不保密（ ）.

（请在以上相应括号内打"✓"）

作者签名：　　　　　　　日期：　　　年　月　日

导师签名：　　　　　　　日期：　　　年　月　日

目　录

Contents

摘　　要

近年来，直接投影法成为求解大规模二次特征值问题的一种常用方法。该方法将大规模二次特征值投影到适当选取的低维子空间，从而达到降阶和保持原问题结构的目的。迭代反位移的 Arnoldi 方法是一种新的直接投影法，它结合了反位移变换，并通过正交投影，利于 Rayleigh-Ritz 过程产生的 Ritz 值和 Ritz 向量分别作为原二次特征值问题的近似特征值和近似特征向量。然而进一步的理论分析表明该算法具有收敛性态的不规则性： Ritz 值收敛，但 Ritz 向量可能收敛得非常慢甚至发散. 为克服这种内在隐患, 基于残量范数极小原则, 本文提出了利用精化向量来实现迭代反位移的 Arnoldi 方法的变形的构想, 给出了新算法的实现方式, 并在理论与实际算法上体现本文所做的修改对于原来算法的改进作用。

本文分一下四个部分: 第一章主要介绍相关的问题背景, 解决这类问题的基本方法以及与论文相关的研究方向及发展动态; 第二章简要的描述了迭代反位移的 Arnoldi 方法; 第三章在引入精化向量的基础上, 具体给出了迭代反位移的 Arnoldi 方法的变形的主要思想, 并在理论上证明了该算法的优越性; 最后一章是数值试验, 对于不同类型的问题进行测试，体现了改进后算法的有效性。

关键词: Arnoldi 过程， Ritz 值， Ritz 向量，迭代反位移的 Arnoldi 方法，精化向量，精化近似特征向量.

Abstract

The direct projection method is the most popular method for solving large scale quadratic eigenvalue problems (QEP). This kind of the method projects the large QEP to a well chosen low- dimension subspace in order to preserve the structure of the original QEP. The iterated shift-and-invert Arnoldi algorithm is a new projection method, it combines with a shift-and-invert transformation and employs the Rayleigh-Ritz procedure to form the approximate eigenpairs. But the further theory analysis prove that the method may converge irregularly: the Ritz vectors are more difficult to converge compared with the corresponding Ritz values. Based on a residual norm minimizing scheme, a variant of the iterated shift-and-invert Arnoldi method is proposed in this paper. The Ritz value is used as the approximate eigenvalue, while the approximate eigenvector is derived by satisfying a certain optimal property, and it can be computed by a small sized singular value problem. Comparisons are done by numerical experiments and it shows that the new method has better performance.

This paper includes four parts. In the first part , related problems and background is introduced and the basic method to solve the large scale QEP is also included. In the second part, we briefly describe the iterated shift-and-invert Arnoldi method. In the third part, based on describing the refined vector, the main idea of a variant of the iterated shift-and-invert Arnoldi method is presented. The last part is the numerical experiment. We test a few problems and the results show that the new variant has better performance than the original algorithm.

Key word: Arnoldi process, Ritz value, Ritz vector, iterated shift-and-invert Arnoldi algorithm ,refined vector, refinde approximate eigenvector.

第一章 引言

§ 1.1 问题的来源

在大量的应用科学和工程计算中，如流体力学，电路模拟与设计，结构力学，计算机分析，动态系统网络和声学的动态分析等科学工程领域，许多问题都归结为大型的二次特征值问题 [18]

$$L(\lambda)x := (A\lambda^2 + B\lambda + C)x = 0, \tag{1.1}$$

的数值求解，其中 $A, B, C \in \mathcal{R}^{n\times n}$ 。若 A 可逆，则（ 1.1) 数学等价于求解

$$L_1(\lambda)x := (I\lambda^2 + A^{-1}B\lambda + A^{-1}C)x = 0, \tag{1.2}$$

对于在实际问题离散后得到一些阶数为几千阶有时为几万阶甚至几十万阶的矩阵需要的往往是二次特征值问题的依实部最大或最小, 依虚部最大或最小, 依模最大或最小的若干个特征值或某区域中的特征值及其对应的特征向量。

正是由于二次特征值问题在许多学科中的广泛应用, 因此二次特征值问题求解的理论研究, 算法的开发和软件的研制等是当今计算数学和科学与工程计算领域的重大课题, 寻求和研究大型二次特征值问题部分特征对的数值方法成为国际学术界的研究热点之一。

§ 1.2 求解大规模二次特征值问题的基本方法

线性化方法是求解大规模二次特征值问题的最基本方法之一。它是将（ 1.1 ）式化为“线性”特征值问题

$$\begin{pmatrix} -B & -C \\ I & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda x \\ x \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} A & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda x \\ x \end{pmatrix}. \tag{1.3}$$

则 (1.1) 和 (1.3) 有相同的特征值，还有其他一些线性化形式 [23,24] ，那么原本求解（ 1.1 ）的大规模的二次特征值问题就转化为求解（ 1.3 ）的一般特征值问题。经过多年的研究，对于 (1.3) ，已有成功开发的 Krylov 子空

间 [2], 位移求逆的 Arnoldi [23,25], 有理 Krylov [26], Jacobi-Davison [27] 等标准化方法可以使用。但线性化方法也存在着这样的弊端：由于线性化，问题的规模变为了原来的两倍，这使得存储量和计算量显著增加；另外出现了线性化后失去了原问题的矩阵结构特点的现象，因而不能有效的发挥原问题的矩阵结构特征。

近年来，人们在求解大规模二次特征值问题时往往倾向于运用直接投影法，其主要的原因就在于该类方法能充分保持原问题矩阵结构特性，它的主要思想是将问题 (1.1) 向适当选取的低维子空间进行特定的投影，将原大规模问题约化为中小规模的二次特征值问题，用标准化方法求解出新的中小规模二次特征值问题的特征对，用其作为原大规模问题的部分特征对的近似。在众多的直接投影法中，比较受欢迎的有：残量迭代法，Jacobi-Davison 方法， SOAR 方法等 [13,16,17,18,19,20,21,28] 。

文献 [1] 也提出了一种利用 $A^{-1}B$ 产生的 Krylov 子空间的直接投影法——迭代反位移的 Arnoldi 方法。 [1] 中指出，如果直接将原问题正交投影到 $A^{-1}B$ 产生的 Krylov 子空间，这样产生的投影子空间就不包含矩阵 C 的信息，而 [1] 中的残量分析也表明由此得出的近似解的残量范数与矩阵 C 之间存在着密切的联系，因此此时可能无法在投影子空间上得到较好的近似解。为减小矩阵 C 对残量范数的影响，该算法与反位移变换相结合，将 $A^{-1}B$ 产生的 Krylov 子空间作为投影子空间，并利用正交投影过程产生的 Ritz 值与 Ritz 向量作为原问题的近似解，同时 [1] 在理论和实际算法中验证了该算法在消除矩阵 C 对残量范数影响力方面的有效性。然而对上述算法进行适当变形，我们从中发现其实它是一种特殊的线性化后并进行正交投影的方法，贾仲孝在 [4,5] 中指出在一般的特征值问题中，对于非对称矩阵 A ，当我们用正交投影方法求解它的部分特征对时，其残量范数的收敛形态可能不规则，即近似特征值收敛而近似特征向量收敛的非常慢甚至不收敛，而这也成为本文中新算法的出发点。本文提出的新算法与迭代反位移的 Arnoldi 方法相比，新算法保留了 Ritz 值作为特征值的近似，而在特征向量选取方面，用在投影子空间满足最优条件的精化近似特征向量作为所求特征向量的近似。本文中的理论分析和数值结

果都表明这种新的方法更有效。

第二章 迭代反位移的 Arnoldi 方法

§ 2.1 Arnoldi 方法

考虑广义的特征值问题

$$(A\lambda + B)x = 0, \tag{2.1}$$

其中 $A, B \in \mathcal{R}^{n\times n}$ 且 A 可逆。则 (2.1) 数值等价于求解

$$(I\lambda + A^{-1}B)x = 0, \tag{2.2}$$

给定 k 维 Krylov 子空间 $\mathcal{K}_k(A^{-1}B, q_1)$, 由 Arnoldi 过程产生它的一组标准正交基 $q_1, \cdots, q_k$, 其矩阵表达式为

$$(A^{-1}B)Q_k = Q_kH_k + h_{k+1,k}q_{k+1}e_k^T,$$

其中 $Q_k = (q_1, \cdots, q_k), \quad H_k = Q_k^T(A^{-1}B)Q_k$ 是上 Hessenberg 阵。

对 (2.2) 利用正交投影法,

$$\begin{cases} (I\lambda + A^{-1}B)x \perp \mathcal{K}_k(A^{-1}B, q_1) \\ x \in \mathcal{K}_k(A^{-1}B, q_1) \end{cases}$$

于是我们就有了正交投影后的中小规模特征值问题:

$$(I\lambda + H_k)x = 0.$$

如果 (θ_0, u) 是 $-H_k$ 的特征对, 那么 (θ_0, Q_ku) 就被称为 Ritz 值和 Ritz 向量, 同时也作为 $A^{-1}B$ 的近似特征对。上述求解一般特征值问题的方法被称为 Arnoldi 方法。近似特征对 (θ_0, Q_ku) 的残量 $\hat{r}_k$ 为

$$\begin{aligned} \hat{r}_k &= (\theta_0 I + A^{-1}B)Q_ku \\ &= \theta_0Q_ku + Q_kH_ku + h_{k+1,k}q_{k+1}e_k^Tu \\ &= \theta_0Q_ku - \theta_0Q_ku + h_{k+1,k}q_{k+1}u_k \\ &= h_{k+1,k}q_{k+1}u_k, \end{aligned}$$

其中 $u = (u_1, \cdots, u_k)^T$.

外部特征值 u 的最后一个分量 u_k 与 $h_{k+1,k}$ 都会随着迭代步数 k 的增大，出现相应减少的情况 [29]，因此 Arnoldi 方法在不考虑存储量和计算量的条件下算法最终将会收敛。

对于大规模二次特征值问题 (1.1)，若 A 可逆，我们同样使用上述的 Arnoldi 方法，在产生矩阵 $A^{-1}B$ 在子空间 $\mathcal{K}_k(A^{-1}B, q_1)$ 的标准正交基 Q_k 下的限制矩阵 H_k 的同时，我们也得到矩阵 $A^{-1}C$ 在子空间 $\mathcal{K}_k(A^{-1}B, q_1)$ 的标准正交基 Q_k 下的限制矩阵 G_k:

$$G_k = Q_k^T (A^{-1}C) Q_k,$$

对 (1.2) 进行正交投影，

$$\begin{cases} (I\lambda^2 + A^{-1}B\lambda + A^{-1}C)x \perp \mathcal{K}_k(A^{-1}B, q_1) \\ x \in \mathcal{K}_k(A^{-1}B, q_1) \end{cases}$$

于是形成投影后的中小规模的特征值问题：

$$L_k(\lambda)x = (I\lambda^2 + H_k\lambda + G_k)x = 0. \tag{2.3}$$

如果 (θ_0, u) 是 (2.3) 的特征对，那么 $(\theta_0, Q_k u)$ 仍被称为 Ritz 值和 Ritz 向量，并作为 (1.1) 的近似特征对。近似特征对 $(\theta_0, Q_k u)$ 的残量 [1] 为

$$r_k = \theta_0 h_{k+1,k} u_k A q_{k+1} + \Delta_k u,$$

其中 $\Delta_k = CQ_k - AQ_k G_k, u = (u_1, \cdots, u_k)^T$.

同 Arnoldi 方法所做的分析一样，随着 k 的增大，外部特征值 u 的最后一个分量 u_k 与 $h_{k+1,k}$ 也会出现相应减少的情况 [29], 因此残量的前半部分 $\theta_0 h_{k+1,k} u_k A q_{k+1}$ 将随着 k 的增大而减小，但另一方面对于残量后半部分而言，除了矩阵 C 是小矩阵的少数情况外， Δ_k 都无法被忽略，所以当残量前半部分足够小的时候，我们有

$$\|r_k\| \approx \|\Delta_k u\| \leq |\Delta_k\|.$$

因此，如果直接应用 Arnoldi 方法于大规模二次特征值问题，则会出现残量范数停滞在 $\|\Delta_k u\|$ 水平上的现象，针对这一缺陷，叶强 [1] 在利用 Arnoldi 方法的基础上结合了反位移变换的思想，由此得出了迭代反位移的 Arnodli 方法。

§ 2.2 迭代反位移的 Arnoldi 方法

在实际应用中，我们往往需要的是某区域中的部分特征对。假定欲求出目标位 σ 附近的特征值，设 $\lambda_0 = \sigma$ 为初始值，进行反位移变换，$\theta := 1/\lambda' = 1/\lambda - \lambda_0$, 则 $L(\lambda)$ 可变为

$$\begin{aligned} L(\lambda) &= A(\lambda' + \lambda_0)^2 + B(\lambda' + \lambda_0) + C \\ &= A\lambda'^2 + (2\lambda_0 A + B)\lambda' + L(\lambda_0), \end{aligned}$$

则

$$L(\theta) = \theta^2 L(\lambda) = \theta^2 \hat{A} + \theta \hat{B} + \hat{C},$$

其中 $\hat{A} = L(\lambda_0), \hat{B} = 2\lambda_0 A + B, \hat{C} = A.$

如果 $det(\hat{A}) = 0$，那么显然 λ_0 是 (1.1) 的特征值。反之，若 $\hat{A}$ 是非奇异阵，则 $L(\theta)$ 可转化为二次特征值问题

$$\hat{L}(\theta)x = \hat{A}^{-1}L(\theta)x = (\theta^2 I + \theta\hat{A}^{-1}\hat{B} + \hat{A}^{-1}\hat{C})x = 0, \tag{2.4}$$

易知 (λ, φ) 是 (1.1) 的特征对数值等价于 (θ, φ) 是 (2.4) 的特征对，其中 $\theta = 1/\lambda - \lambda_0$. 因此，计算 σ 附近的特征值数值等价于计算 (2.4) 的模最大特征值。

关于 $\hat{A}^{-1}\hat{B}$ 与初始值 v_1 的 Arnoldi 过程的矩阵表达形式为：

$$\hat{A}^{-1}\hat{B}V_m = V_m H_m + h_{m+1,m} v_{m+1} e_m^T, \tag{2.5}$$

其中 $V_{m+1} = (V_m, v_{m+1}) = [v_1, v_2, \cdots, v_{m+1}]$ 是 $n \times (m+1)$ 阶矩阵，它的列构成了 $\mathcal{K}_{m+1}(\hat{A}^{-1}\hat{B}, v_1)$ 的一组正交基，H_m 是 $m \times m$ 上 Hessenberge 阵。

对 (2.4) 利用正交投影法，即用满足

$$\begin{cases} (\tilde{\theta}^2 I + \tilde{\theta}\hat{A}^{-1}\hat{B} + \hat{A}^{-1}\hat{C})\tilde{\varphi} \perp \mathcal{K}_m(\hat{A}^{-1}\hat{B}, v_1) \\ \tilde{\varphi} \in \mathcal{K}_m(\hat{A}^{-1}\hat{B}, v_1) \end{cases} \tag{1}$$

的 $(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})$ 称为 (2.4) 的近似特征对。

因为 $\tilde{\varphi} \in \mathcal{K}_m(\hat{A}^{-1}\hat{B}, v_1)$ ，所以

$$\tilde{\varphi} = V_m g, \tag{2.6}$$

由关系式 (2.5),(2.6)， (1) 可转化为下面的小规模二次特征值问题

$$(\tilde{\theta}^2 I + \tilde{\theta} H_m + G_m) g = 0, \tag{2.7}$$

如果 $(\tilde{\theta}, g)$ 是 (2.7) 的模最大特征值所对应的特征对，那么 $(\tilde{\theta}, V_m g)$ 就是 (2.4) 的模最大特征值所对应的特征对。令 $\tilde{\lambda} = \sigma + 1/\tilde{\theta}$ ，则迭代反位移 Arnoldi 方法用 $(\tilde{\lambda}, \tilde{\varphi})$ 来作为 (1.1) 的近似特征对。

定义近似特征对 $(\tilde{\lambda}, \tilde{\varphi})$ 的相应残量为:

$$r := (A\tilde{\lambda}^2 + B\tilde{\lambda} + C)\tilde{\varphi},$$

则该算法的残量范数的上界由下面定理给出。

定理 1: 如果 $\tilde{\theta}$ 是 $\hat{L}_m(\theta)$ 模最大的特征值， $\tilde{y} = [y_1, y_2, \cdots, y_m]^T$ 为相应的特征向量，令 $\tilde{\varphi} = V_m \tilde{y}$ ，及 $\tilde{\lambda} = \lambda_0 + 1/\tilde{\theta}$, 则有

$$||A\tilde{\lambda}^2 + B\tilde{\lambda} + C)\tilde{\varphi}|| \le \frac{|\tilde{\lambda}^2 - \lambda_0^2|}{2|\lambda_0|} h_{m+1,m} y_m ||L(\lambda_0) q_{m+1}|| + \frac{|\tilde{\lambda} - \lambda_0|^2}{2|\lambda_0|} ||\Delta_m y||,$$

其中 $\Delta_m = BV_m - L(\lambda_0) V_m \hat{G}_m, \quad \hat{G}_m = V_m^T \hat{A}^{-1} B V_m.$

证明: 见 [1].

随着 Arnoldi 算法迭代步数 k 的增大，残量范数界的前半部分将逐渐减少 [29]，后半部分虽然含有 $\|\Delta_m u\|$ ，但它与 $|\lambda_1 - \lambda_0|^2$ 同阶，随着位移 λ_0 的不断更新， λ_1 与 λ_0 接近的程度将不断增大，残量后半部分的影响力也将逐步减弱。在算法的具体实现方式上，将重复 Arnoldi 过程的迭代直到残量前半部分在某种程度小于后半部分 (也就是说更多的 Arnoldi 过

程迭代对残量范数的影响不大了)，然后利用满足 $|\lambda-\sigma|\le\eta$ 的新生成的特征值 λ 作为新的位移进行重新启动。

算法 1 **迭代反位移 Arnoldi 方法**.

1. 输入：初始位移 σ，位移更新准则 η，初始单位向量 v_1，精度 tol，Arnoldi 过程最大迭代步数 k，令 $\lambda_0=\sigma$
2. 计算反位移变换后的二次特征值问题的新矩阵 $\hat{A},\hat{B},\hat{C}$
3. 迭代： for j=1:k

   (3.1) 利用 Arnoldi 过程确定 Hessenberg 阵 H_j 以及 $\mathcal{K}_j(\hat{A}^{-1}\hat{B},v_1)$ 子空间的一组标准正交基 V_j，并计算 $G_j=Q_j^T(A^{-1}C)Q_j$；

   (3.2) 计算 $I\mu^2+H_j\mu+G_j$ 的模最大特征值对应的特征对 (μ_0,u)；

   (3.3) 计算原问题的近似特征对 $\lambda_1=\lambda_0+\mu_0^{-1}$；

   (3.4) 计算残量范数界前半部分 $\gamma_1=\frac{|\tilde{\lambda}^2-\lambda_0^2|}{2|\lambda_0|}h_{m+1,m}y_m|\hat{A}L(\hat{\lambda}_0)q_{m+1}||$；

   (3.5) 计算残量范数界后半部分 $\gamma_2=\frac{|\tilde{\lambda}-\lambda_0|^2}{2|\lambda_0|}||(BV_m-L(\lambda_0)V_m\hat{G}_m)y||$；

   (3.6) 满足 $\gamma_1\le0.1\gamma_2$，跳出循环;
4. 计算近似特征向量： $x=V_ju$;
5. 位移更新：若 $|\lambda_1-\sigma|<\eta$，则 $\lambda_0=\lambda_1$;
6. 计算残量 $r=(\lambda_1^2A+\lambda_1B+C)x$，如果 $\frac{||\tilde{r}||}{|\lambda|^2||A||_1+|\lambda|||B||_1+||C||_1}<tol$ 则停机，否则转步骤 2.

上述算法的具体实现细节可参考文献 [1]。然而对于算法 1，我们进行适当的变形，发现了该算法的一个内在的性质。

性质 1: 在精确计算的前提下，迭代反位移的 Arnoldi 方法等价于线性化后并利用 $span\{\begin{pmatrix} V_m & 0 \\ 0 & V_m \end{pmatrix}\}$ 作为投影子空间的正交投影化方法。

证明： 定义

$$P_{2m} = \begin{pmatrix} -H_m & -G_m \\ I_m & 0 \end{pmatrix},$$

$$P = \begin{pmatrix} -\hat{A}^{-1}\hat{B} & -\hat{A}^{-1}\hat{C} \\ I & 0 \end{pmatrix},$$

及 $V_{2m} = \begin{pmatrix} V_m & 0 \\ 0 & V_m \end{pmatrix}$, 那么有

$$P_{2m} = V_{2m}^T P V_{2m}.$$

容易看出 (2.7) 的特征对 $(\tilde{\theta}, g)$ 满足

$$P_{2m} \begin{pmatrix} \tilde{\theta} g \\ g \end{pmatrix} = \tilde{\theta} \begin{pmatrix} \tilde{\theta} g \\ g \end{pmatrix}. \tag{2.8}$$

所以迭代反位移的 Arnoldi 方法可看作是一种特殊的线性化后并结合正交投影的一种投影化方法。